



University of Groningen

## The structure of stepped surfaces. On the investigation of the atomic structure of (stepped) copper surfaces with Low Energy Ion Scattering

Algra, Ale Jan

**IMPORTANT NOTE:** You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

*Document Version*

Publisher's PDF, also known as Version of record

*Publication date:*

1981

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

*Citation for published version (APA):*

Algra, A. J. (1981). The structure of stepped surfaces. On the investigation of the atomic structure of (stepped) copper surfaces with Low Energy Ion Scattering. s.n.

### Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

### Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

### Inleiding en Samenvatting.

In een vaste stof bevinden zich ongeveer  $10^{23}$  atomen per kubieke centimeter, en aan het oppervlak ongeveer  $10^{15}$  per vierkante centimeter. Aangezien dit laatste getal te verwaarlozen is ten opzichte van het eerste, zou men kunnen denken dat de invloed van het oppervlak op de eigenschappen van de materie te verwaarlozen is. Voor sommige -zoals bijvoorbeeld de sterkte, de warmtegeleiding, de structuur waarin de atomen gerangschikt zijn, het smeltpunt etc.- is dat inderdaad zo. Echter, omdat de wisselwerking van een stukje materie met zijn omgeving noodzakelijkerwijs altijd plaatsvindt via het oppervlak ervan, is voor diverse andere eigenschappen de aard van het oppervlak van groot belang. Om enkele voorbeelden te noemen: de reflectie en adsorptie van licht (bepalend voor de kleur), de geleiding van electronen door het oppervlak (contact weerstand), de adsorptie en eventueel daarop volgende absorptie van molekulen en atomen uit de omgeving (o.a. van belang voor de opslag van waterstof in materie, en voor de oxydatie (roest)), en de (verhoogde) reactiesnelheid tussen verschillende geadsorbeerde gassen (gebeurt bijv. op de anode en kathode platen in accu's, en bij de reactie van CO en  $O_2$  tot  $CO_2$  op platina oppervlakken). Bij sommige van deze eigenschappen zijn de aanwezige vrije electronen van belang, en bij andere meer de positie van de atomen zelf.

Over deze laatste karakteristiek van de materie, de positie van atomen aan het oppervlak, handelt dit proefschrift. De afstanden tussen de atomen die bestudeerd moeten worden zijn erg klein, in de orde van een paar Angström ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ). Er zijn dan ook niet veel methodes die voor een dergelijke studie gebruikt kunnen worden. Zelfs met de beste electronen-microscop kunnen in het algemeen geen details met afmetingen beneden de  $100 \text{ \AA}$  worden waargenomen. Omdat we bovendien als eis stellen dat alleen de allerbuitenste laag van de materie, en niet verscheidene atoomlagen tegelijk, bestudeerd moet worden, is ook het gebruik van bijvoorbeeld röntgenstraling niet mogelijk, immers deze dringt ver het materiaal in alvorens verstrooid of geadsorbeerd te worden.

Eén van de resterende mogelijkheden is het gebruik van "ionenverstrooiing". Deze techniek bestaat hieruit dat ionen -van een te kiezen soort, bijvoorbeeld waterstof, neon of kalium- versneld worden m.b.v. een spanning van een paar duizend Volt, en op een trefplaatje gericht worden. Daar aangekomen botsen de ionen met de atomen van het te onderzoeken trefplaatje en hebben een grote kans om in één of andere richting verstrooid te worden. Met een detectiesysteem wordt dan het aantal, de richting en de energie (of snelheid) van de verstrooide deeltjes gemeten, en het blijkt dat de gedetecteerde ionen voor maar een klein percentage verstrooid zijn onder het oppervlak, of in ieder geval duidelijk te onderscheiden zijn van de ionen verstrooid door de atomen die het oppervlak vormen.

Het is al langere tijd bekend dat met deze techniek de massa van de atomen aan het oppervlak vastgesteld kan worden. Hiertoe worden de experimentele omstandigheden zo gekozen dat de gedetecteerde ionen in één keer, na een zogenaamde "enkelevoudige botsing", verstrooid zijn. Behoudens in enkele speciale gevallen waarin gebruik gemaakt kan worden van de "schaduwwerking" van atomen (d.w.z. dat oppervlakte atomen zich in de "schaduw" van hun buuratomen bevinden en daarom niet door projectielen getroffen kunnen worden) levert dit echter geen informatie op over de structuur van het oppervlak maar alleen over de samenstelling.

Als nu de experimentele omstandigheden juist gekozen worden, bestaat er echter ook een vrij grote kans dat de gedetecteerde ionen verstrooid zijn na met meerdere oppervlakte atomen te hebben gebotst; dit wordt "meervoudige verstrooiing" genoemd. Het is wel aan te voelen dat de onderlinge positie van de oppervlakte atomen van invloed zal zijn op de kans dat meervoudige verstrooiing optreedt.

Dit verband vormt de basis van dit proefschrift, waarin bestudeerd is of met behulp van meervoudig verstrooide ionen kwantitatieve informatie over de structuur van oppervlakken verkregen kan worden. Als test trefplaatjes zijn koper éénkristallen gebruikt met een (100) en een (410) oppervlakte

oriëntatie. In de kregen resultaten

In hoofdstuk de meervoudige ionen heden waaronder keuze van het proef tectie systeem be apparatuur gestel

In hoofdstuk tiel geïoniseerd strooiing. Deze volgrede verstrooi gedrag van edelg klaard worden me evenwicht tussen nen van het tref

Deze resultaten relatieve kans op deerd wordt. Het afstanden van opp nen worden in la Voor hoog geëind "zig-zag botsing maar maken deze

In hoofdstuk vlak bepaald. Dit te zijn bestaande door stapjes van standigheden in de "plateaupiek" wordt gevonden is teau waarlangs de thode afgeleid o

Dat de oppervl van de bulk struc beschreven meting enigszins glad g

oriëntatie. In de volgende hoofdstukken zijn enige van de verkregen resultaten vermeld.

In hoofdstuk 1 is een algemeen overzicht gegeven betreffende de meervoudige ionenverstrooiing, de experimentele omstandigheden waaronder dit verschijnsel optreedt (o.a. worden de keuze van het projectiel soort en de strooihoek van het detectie systeem besproken), en de voorwaarden die aan de meetapparatuur gesteld moeten worden.

In hoofdstuk 2 is de kans beschreven dat een alkali projectiel geïoniseerd, respectievelijk neutraal, is na de verstrooiing. Deze kans blijkt onafhankelijk te zijn van de gevolgde verstrooiingsbaan (dit is in groot contrast met het gedrag van edelgas projectielen). De metingen kunnen goed verklaard worden met een theorie die het veranderende ladings-evenwicht tussen het alkali deeltje en de geleidingsselectronen van het trefplaatje beschrijft.

Deze resultaten vormen de basis van hoofdstuk 3 waarin de relatieve kans op een enkelvoudige en dubbele botsing bestudeerd wordt. Het blijkt dat uit deze verhouding interatomaire afstanden van oppervlakteatomen tot ongeveer 8 Å bepaald kunnen worden in laag geïndiceerde richtingen aan het oppervlak. Voor hoog geïndiceerde richtingen bemoeilijken zogenaamde "zig-zag botsingen" de interpretatie van de meetresultaten maar maken deze niet onmogelijk.

In hoofdstuk 4 wordt de structuur van het koper (410) oppervlak bepaald. Dit blijkt een regelmatige gestapte structuur te zijn bestaande uit plateaus van 7.2 Å breed gescheiden door stapjes van 1.8 Å hoog. Ook blijkt dat in speciale omstandigheden in de energiespectra van de verstrooide ionen de "plateaupiek" op kan treden. De energie waar deze piek wordt gevonden is gecorreleerd aan de lengte van het plateau waarlangs de ionen zijn verstrooid. Hieruit is een methode afgeleid om plateaulengtes tussen 15 en 60 Å te bepalen.

Dat de oppervlaktestructuur niet eenvoudig een voortzetting van de bulk structuur is, blijkt in hoofdstuk 5. Uit de daar beschreven metingen volgt dat het gestapte (410) oppervlak enigszins glad getrokken is. Met name de "hoekatomen" op de

randen van de stappen zijn wat naar beneden gezakt, terwijl de daarbij behorende "onder-hoekatomen" naar boven zijn verplaatst. De verplaatsingen bedragen maximaal 0.18 Å.

In hoofdstuk 6 tenslotte wordt beschreven hoe de adsorptie en desorptie van zuurstof op het koper (410) oppervlak verloopt. Zuurstof molekulen adsorberen dissociatief en de zuurstof atomen zoeken vervolgens een plaats niet op de plateaus maar in de holletjes aan de stapranden. De adsorptie positie is bepaald uit gemeten hoek- en energie verdelingen met een nauwkeurigheid van ongeveer 0.2 Å.

## CHAPTER I

### STRUCTURE ANALYSIS ENERGY IONS.

#### Abstract.

The state-of-the-art is discussed as far as multiple scattering is concerned. A demarcation is given. Several effects to determine the features of the structure are employed are